

Автор:

Шпанов Дмитрий Алексеевич

ученик 11 б класса

Руководитель:

Шкляев Валерий Александрович

младший научный сотрудник ИСЭ СО РАН

Областное государственное бюджетное образовательное

учреждение «Томский физико-технический лицей»

г. Томск, Томская обл.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АТОМОВ И МОЛЕКУЛ ГАЗА

Ключевые слова: вычислительная математика, численный анализ; свойства газов; потенциал Леннарда-Джонса; объектно-ориентированное программирование

Аннотация:

Исследования частиц размером порядка нескольких ангстрем (характерен обособленным атомам, двух- или трёхатомным молекулам) порой поражают привыкший к макромиру ум экзотическими явлениями. Причудливые с первого взгляда свойства, подчиняющиеся законам квантовой механики, можно задавать по своему желанию, меняя, например, размер или потенциал взаимодействия частиц. Поэтому данное направление исследования перспективно и в будущем позволит создавать материалы для всех сфер жизни, начиная от космических технологий, заканчивая медициной.

Поскольку увидеть, измерить и «пощупать» настолько малые частицы привычными методами невозможно, ученые обращаются к компьютерному моделированию для исследования сложных систем. Оно позволяет рассчитать

движение каждой из миллиарда частиц и её взаимодействие с остальными. Начальные условия легко менять, что позволяет воспроизвести физические явления, повторить которые в реальном опыте очень сложно. Цель моей работы – разобраться с основами компьютерного моделирования на примере взаимодействия атомов газа. В рамках работы моделирование выполнял в среде программирования Pascal ABC.net, а также на Processing (Java) .

Основная часть

Из истории:

Элементы математического моделирования использовались с возникновением точных наук, некоторые методы вычислений носят имена Ньютона и Эйлера, а слово «алгоритм» происходит от имени основателя алгебры аль-Хорезми. Второе «рождение» этой методологии в конце 40-х - начале 50-х гг. XX века обусловлено появлением ЭВМ (первых компьютеров, избавивших ученых от огромной по объему рутинной вычислительной работы), и выполнение национальных программ СССР и США по созданию ракетно-ядерного щита, не реализуемых традиционными методами. Математическое моделирование справилось с задачей: ядерные взрывы и полеты ракет и спутников перед практическими испытаниями были рассчитаны ЭВМ с помощью математических моделей. Впоследствии разработаны эффективные численные методы и программы для многих классов задач.

Сейчас математическое моделирование вступает в новый этап своего развития, «встраивается» в структуры информационного общества. Прогресс средств переработки, передачи и хранения информации отвечает мировым тенденциям к усложнению и взаимному проникновению различных сфер человеческой деятельности, это помогает решать все более разнообразные задачи, стоящих перед мировым сообществом.

Наиболее впечатляющие успехи достигнуты при применении математического моделирования в инженерии и технологии, отмечается все возрастающую роль математики в химии, биологии, экономике, истории и др. гуманитарных науках благодаря опыту, накопленному при математизации

механики и физики, благодаря достигнутому уровню развития самой математики.

Модель:

Вспомним, что модель представляет собой абстракцию, которая обладает не абсолютно всеми свойствами реального объекта, а только нужными для наших вычислений.

В компьютерной модели считаем время *дискретным*, потому что техника не может производить расчёт с абсолютной точностью: только через определенные промежутки - *шаги по времени*. Это удобно тем, что в течение этого промежутка времени мы можем пренебречь изменением скорости, ускорения, силы и т.д.. В модели мы можем менять количество шагов – изменяя погрешность измерения. Следует отметить, что очень малая величина шага по времени приведёт к накоплению ошибок вычисления компьютера (округление), поэтому важно найти оптимальный порядок изменения.

Из-за дискретности времени уравнения движения пишем в *разностном* виде: $v(x) = \frac{\Delta x}{\Delta t}$, где Δt – шаг по времени, $\Delta x = x_t - x_{t-1}$ – разность координат по оси ОХ в настоящий момент времени и в предыдущий. Аналогично по осям ОУ и ОZ:

$v(y) = \frac{\Delta y}{\Delta t}$, $v(z) = \frac{\Delta z}{\Delta t}$, $\Delta z = z_t - z_{t-1}$. В разностном виде

записываются уравнения ускорения: $a(x) = \frac{\Delta v(x)}{\Delta t}$, где $\Delta v(x) = v(x)_t - v(x)_{t-1}$

$v(x)$ - проекция вектора скорости на ось Ох; $a(y) = \frac{\Delta v(y)}{\Delta t}$, $a(z) = \frac{\Delta v(z)}{\Delta t}$.

По второму закону Ньютона $a = \frac{F}{m}$, где $F = F_1 + F_2 + \dots + F_n$ – равнодействующая сила.

Задавать параметры для каждой новой частицы из миллиарда в новой строчке кода нерационально. Поэтому используем *объектный подход*.

В одном стандартном массиве сохраняется значения только одной физической величины для каждой из частиц. Затруднение не только в объёме кода и сложности понимания, но и в обработке данных, ведь для отображения частицы нужно знать одновременно много параметров.

Недостатков массива переменных лишен класс. Создавая массив объектов одного типа – *класса*, легко регулировать число объектов и задавать начальные условия сразу для всех частиц. Один объект заданного класса содержит все данные об одной частице. В класс единожды прописываются функции, используемые для всех объектов через каждый шаг по времени.

Для учета взаимодействия между частицами используем **потенциал Леннарда-Джонса**. Он описывает зависимость потенциальной энергии притяжения и отталкивания атомов от расстояния между ними: $U(\mathbf{r}) = 4\epsilon * [(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6]$, где r — расстояние между центрами частиц, ϵ — глубина потенциальной ямы (модуль минимального значения потенциальной энергии, для атомов эта энергия отрицательная), σ — расстояние, на котором энергия взаимодействия становится равной нулю.

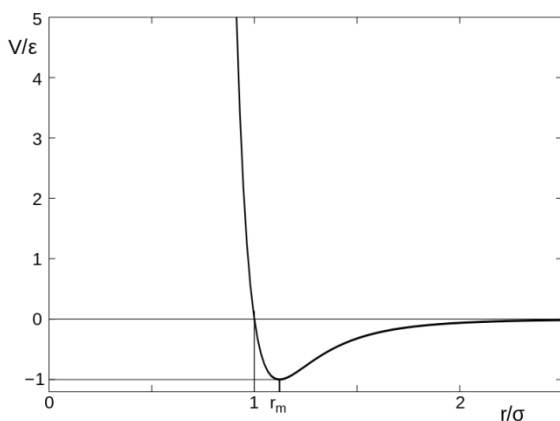


Рис. 1 Потенциал Леннарда-Джонса

Этот потенциал в доступной для вычислений форме описывает экспериментально обнаруженные *притяжение* атомов при больших расстояниях (в теории - силы Ван-дер-Ваальса) и *отталкивание* при малых расстояниях (из-за квантовой механики). Примечательно, что этим же законом можно предсказывать температуры и давления *фазовых переходов*

Зависимость силы от расстояния между атомами (ось ОХ - расстояние, ось ОУ - сила) наглядно на рисунке: $F(r) = -24 \cdot \epsilon \cdot \frac{6^6}{r^7} + 48 \cdot \epsilon \cdot \frac{6^{12}}{r^{13}}$ получается интегрированием по dr потенциала Леннарда-Джонса. На графике положительная часть силы соответствует отталкиванию, отрицательная притяжению.

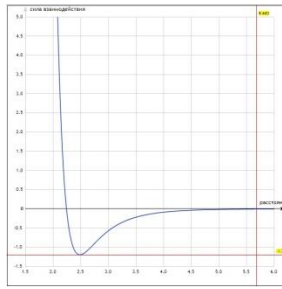


Рис. 2 Зависимость силы взаимодействия от расстояния

Тем не менее, силы между частицами можно находить только попарно. Чтобы описать взаимодействие большого числа частиц, нужно реализовать в программе цикл в цикле (внутренний цикл начинается с номера переменной количества выполнений первого цикла плюс 1), в котором частице в левом и верхнем крае экрана присваиваются положительные проекции силы на оси ОХ и ОУ, а другой частице отрицательные.

Расстояние между частицами удобно вычислять через их координаты:

$$r = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2}.$$

Таким образом, мы описали теоретические основы, необходимые для построения модели. Следует проверить правильность модели.

Тесты прямолинейного движения:

Данная модель была протестирована на простых задачах.

Проверяем правильность модели с помощью второго закона Ньютона в импульсной форме $\Delta p = F \cdot \Delta t$

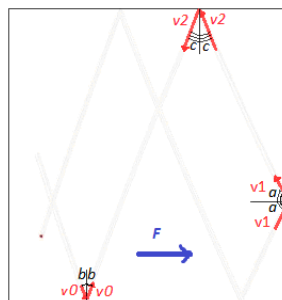


Рис. 3. Проверка законов сохранения механической энергии и импульса

На рис. 3 можно видеть, что модуль скорости частицы до столкновения с неподвижным объектом и после равны (красные стрелки разной длины, т.к. частица ускоряется под действием силы). Угол падения равен углу отражения,

что говорит о неизменности проекций импульса на горизонтальную и вертикальную оси.

Далее нужно проверить глубину потенциальной ямы на закон сохранения

энергии: $E_k = E_p \rightarrow m \frac{v^2 - v_0^2}{2} = 4\varepsilon * [(6/r)^{12} - (6/r)^6] - (-\varepsilon)$ Удобнее находить не скорость и потенциальную энергию в каждый момент времени, а сравнить максимальную кинетическую энергию с максимальной потенциальной. Минимальное расстояние находится: $r_{min} = \sigma \sqrt[6]{2}$

mi		mi		погр		погр	
n	0	p	max	n	k	E (%)	ость (%)
.1		.679	.179	.12	.67	.148	.007
2		6634	9025	23	96	14E-	2668
2	.5	06	51	8	63	05	34
		.959	.213	.78	.95	.275	.001
.78		1123	7101	57	91	42E-	3288
7	6	.5	92	14	34	12	05
		.475	.150	.12	.47	.506	.005
.12		7643	5172	24	57	88E-	1160
7	2	.5	84	67	05	64	06
		.584	.166	.78	.58	.451	.002
.57		7689	8716	57	47	29E-	4762
7	23		149	78	04	69	05
		.497	.153	.56	.49	.387	.008
5	5	12	.5	2602	8800	11	72
						43E-	7835

		31		79	32	82	6	05	08
		.56		.469	.149	.56	.46	.020	.002
.	.	12		2382	4813	12	92	13E-	0722
5	5	31		81	78	43	38	05	632
		.56		.269	.113	.56	.26	.222	.001
.	.	12		6565	3171	12	96	4E-	8777
5	5	31	.7	39	81	42	56	05	34
.	.	.01		.009	.021	.01	.00	.110	.054
0	0	12		3847	1515	12	93	7825	5273
1	1	25	.02	7	65	19	95	72	05
.	.	.01	.03	.009	.021	.01	.00	.000	.041
0	0	12	36	9725	7918	12	99	1206	1638
1	1	25	74	84	68	2	73	07	25
.	.	.01		.009	.021	.01	.00	.289	.005
0	0	12		9452	7619	12	99	75E-	5278
0	1	1	25	.03	06	21	24	45	08
		.24			9.19		22	.362	.023
		49			3069	.24	58.	27E-	3458
1		24		2258	24	44	03	05	5
		.24		.359			.35	.255	.023
		49		3268	.54E	.24	93	1E-	3458
2		24		11	-01	44	27	10	5
		.56	.84	.664	.282		.67	.919	.023
.		12	18	2487	8053	.56	95	7901	3458
3	5	31	47	12	6	11	56	24	5
4	.	.24	.24	.799	.26E	.24	.8E	.159	.003

5 49 49 67E- -08 5 -13 7580 3811
 24 24 13 37 11

Модель
 протестирована на
 столкновениях двух

видов:

1) прямое («лоб в лоб»)

2) с прицельным параметром

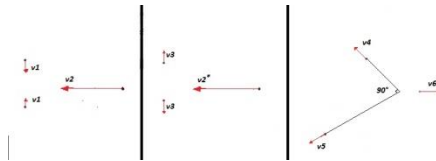


Рис. 4 Непрямое соударение с прицельным параметром.

Так как законы сохранения энергии и импульса справедливы в нашей модели, можно наблюдать движение, похожее на столкновение макрочастиц. Но нужно помнить, что в микромире столкновением частиц можно пренебречь, а взаимодействие друг с другом в основном происходит под действием сил.

Тесты с колебанием

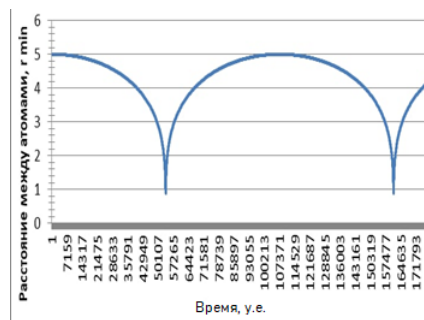


Рис. 5 Колебательное движение частиц

Как было сказано ранее, для потенциала Леннарда-Джонса характерна яма. Если два объекта «поместить» в неё, т.е. расположить на определённом расстоянии друг от друга, частицы начнут колебаться.

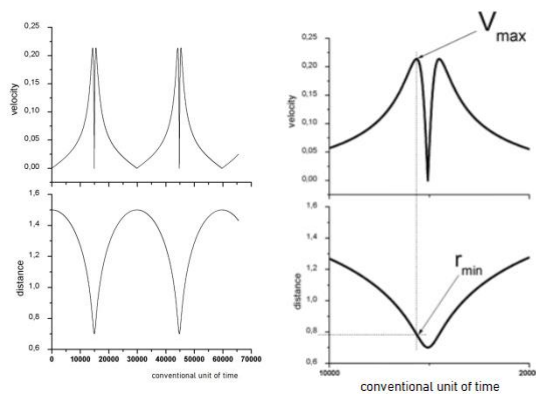


Рис. 6 Потенциальная яма и колебания атомов двухатомной молекулы относительно положения равновесия

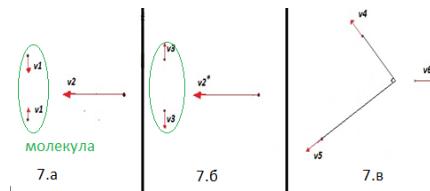


Рис. 7. Диссоциация молекулы при столкновении.

На рис. 7.а две частицы с равной массой совершают колебательное движение (находятся на расстоянии $2 r_{\text{min}}$), образуя двухатомную молекулу. При этом атомы имеют равные скорости v_1 . Навстречу им с горизонтальной скоростью v_2 движется 3-я частица. Рис. 7.б - скорость 3-ей частицы увеличивается до v_2^* под действием притяжения к молекуле, атомы в которой изменяют скорости до v_3 .

Рис. 7.в - частица 3 приближается к первым двум достаточно близко, и возникают силы отталкивания - скорость 3 частицы направлена в противоположную сторону и меняется по модулю. Происходит **диссоциация молекулы**, и несвязанные частицы осколками разлетаются в стороны, противоположные вектору v_6 . Угол между векторами скоростей v_4 и v_5 составляет 90 градусов. Результирующий вектор этих двух векторов равен по модулю v_6 и противоположно направлен.

Заключение

Разработана программа на объектно-ориентированном языке программирования. Тесты макроскопических параметров показали хорошее соответствие с реальными физическими законами сохранения энергии и импульса. Физические законы выполняются также на уровне атомов, о чём свидетельствует образование стабильных молекул и кристаллических решёток из отдельных атомов. Это говорит о том, что программа способна осуществлять моделирование базовых физических явлений и при развитии модели будет способна решать конкретные практические задачи.